

# Modélisation de la propagation de la détonation dans les explosifs condensés

L'onde de détonation et les caractéristiques propulsives d'un explosif condensé dépendent de données et processus aussi variés que l'équation d'état de l'explosif inerte, la décomposition chimique qui a lieu dans la zone de réaction, la cinétique de cette décomposition, les propriétés thermodynamiques des produits de détonation, la courbure de l'onde de détonation ou encore les interactions entre l'onde de détonation et les matériaux connexes. Des avancées récentes nous ont permis d'améliorer la modélisation des propriétés thermodynamiques des produits de détonation ainsi que celle de la propagation de l'onde de détonation dans le cas d'écoulements divergents (l'onde se propage alors avec une célérité inférieure à la vitesse théorique de Chapman-Jouguet – CJ) et convergents (célérité supérieure à la vitesse CJ).

N. Desbiens • V. Dubois • C. Matignon • R. Sorin • O. Bozier CEA–DAM Île-de-France

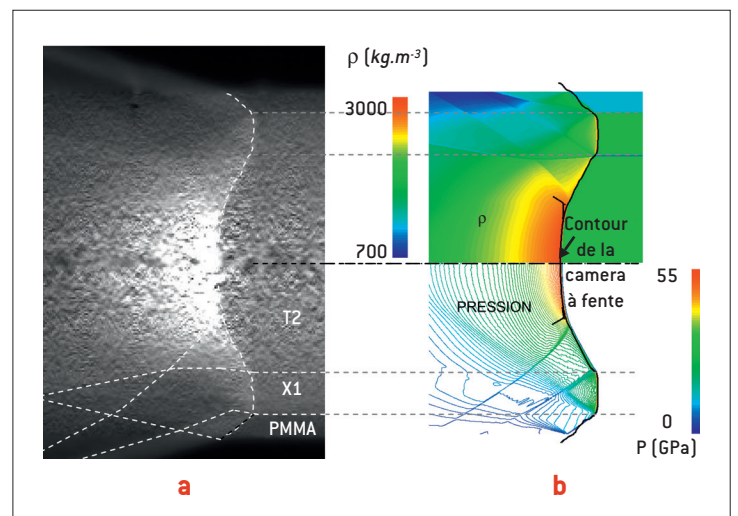
Parmi les modèles régissant la détonation dans les explosifs condensés, la description des propriétés des produits de détonation et de la propagation de l'onde de détonation a connu des avancées notables. Concernant le pouvoir propulsif, le code de thermo-chimie CARTE modélise avec précision les propriétés thermodynamiques des produits de détonation. La dernière version du code a permis de reproduire avec une précision inférieure au pourcent les résultats « exacts » issus de simulations atomistiques. Pour les aspects propagation, les modèles de calcul ont été confrontés avec succès à des études expérimentales récentes de propagation d'onde de détonation convergente et de contournement d'obstacle.

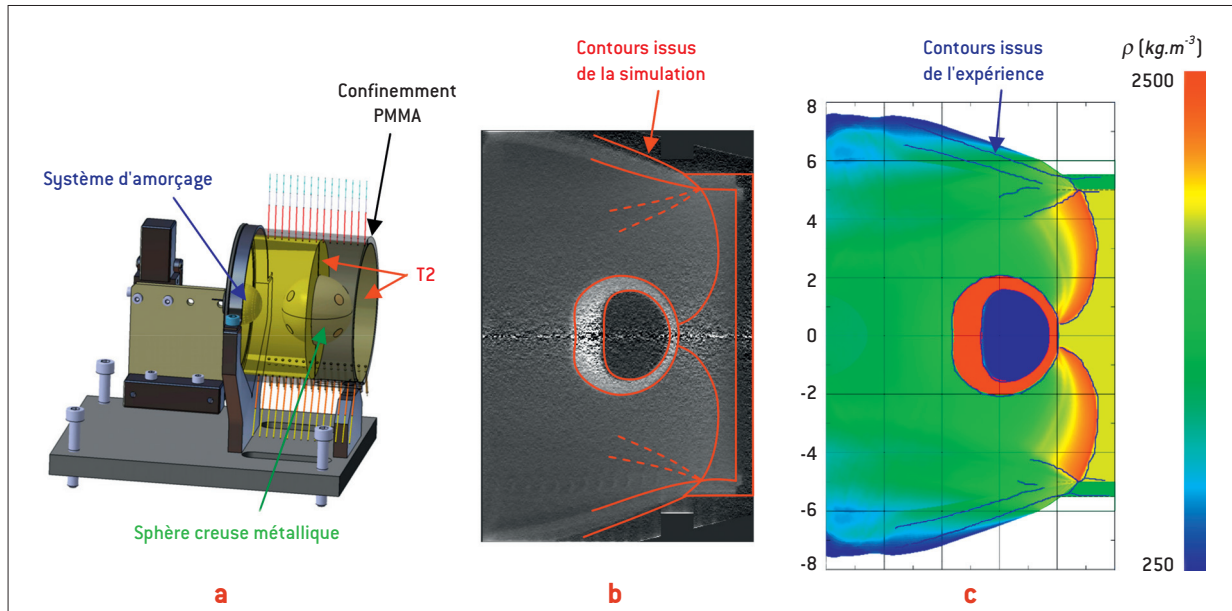
## Propriétés thermodynamiques des produits de détonation

Le code de thermo-chimie CARTE calcule la composition à l'équilibre thermodynamique d'un mélange d'espèces chimiques en minimisant l'énergie libre de Gibbs du système. Ce système est formé d'une phase fluide et d'une phase condensée qui contient du carbone sous forme d'agrégats de taille micrométrique. La phase condensée est traitée par une équation d'état analytique qui permet de reproduire les propriétés de cette population d'agrégats. L'énergie libre de la phase fluide, constituée de molécules simples telles que  $N_2$ ,  $CO_2$ ,  $H_2O$ ,  $CO$ ,  $NO$ ,... est déterminée en assemblant différentes briques de calcul. Parmi celles-ci, la brique de calcul des propriétés thermodynamiques d'excès a récemment été modifiée. Une nouvelle méthode KLRR (Kang-Lee-Ree-Ree) publiée en 2006 a été confrontée à une base de données de résultats « exacts » issus de simulations atomistiques [1,2]. Ces travaux ont montré que, dans la gamme thermodynamique d'intérêt, l'écart relatif moyen entre la méthode KLRR et les simulations atomistiques est d'environ 0,7%, soit un écart trois fois plus faible qu'avec la méthode

précédemment utilisée. De la même manière, la brique de calcul du fluide effectif qui mime le mélange d'espèces a été réexaminée. Un ensemble représentatif de mélanges binaires et ternaires a été étudié par simulations atomistiques. Les résultats de ces calculs ont servi de base de données pour la construction d'une nouvelle loi de calcul du fluide effectif (VdW-6p) [1]. La combinaison de la méthode KLRR et de la loi VdW-6p pour le fluide effectif permet au code CARTE de reproduire des calculs atomistiques de points CJ d'explosifs-modèles avec un écart inférieur à 0,25%. Afin de restituer les propriétés thermodynamiques d'explosifs variés, les paramètres restés libres ont été fixés par une procédure de calibration, dont les détails ont été publiés récemment [3]. On reproduit ainsi avec une grande précision les caractéristiques CJ d'explosifs variés [1].

Figure 1. Propagation d'une détonation convergente à vitesse constante [supérieure à  $D_{CJ}$ ]. (a) : reconstruction tomographique de la radio expérimentale – (b) : cartes de pression et densité issues de la simulation





**Figure 2.** Propagation d'une détonation PMMA d'un obstacle sphérique.  
 [a] : montage expérimental – [b] : reconstruction tomographique de la radio expérimentale – [c] : carte de densité issue de la simulation.

### Propagation d'onde de détonation convergente

La célérité de détonation théorique  $D_{CJ}$  correspond à la vitesse de propagation d'un front plan stationnaire. Dans la réalité, la détonation se propage à une vitesse inférieure ou supérieure à  $D_{CJ}$  selon que le front est divergent ou convergent. C'est la compétition entre la vitesse de décomposition de l'explosif (réactions chimiques) et l'expansion de l'explosif qui détermine la vitesse de propagation. Un modèle basé sur les travaux de Wescott et Stewart a été développé pour modéliser l'ensemble de ces phénomènes [4]. L'équation d'état réactive de l'explosif est composée d'un mélange idéal d'une phase non brûlée qui reproduit les courbes d'Hugoniot de l'explosif inerte et d'une phase complètement réagie prédite par le code CARTE. Le taux de décomposition de l'explosif est ensuite calibré pour reproduire des expériences simples telles que profondeurs d'amorçages ou vitesses en cartouche. Ce modèle a ensuite été testé en dehors de son domaine de calibration sur deux expériences. La première consistait à imposer un régime convergent stationnaire à une onde de détonation. Un front de détonation dans un cylindre d'explosif lent était forcé par la détonation plus rapide d'un cylindre d'explosif extérieur (figure 1). La seconde servait à tester le modèle dans une situation complexe : une détonation sphérique divergente impacte puis contourne un obstacle sphérique, et enfin converge en un point derrière l'obstacle en accélérant par convergence (figure 2). Le modèle permet de rendre compte précisément de la chronométrie et des systèmes d'ondes de compression et de détente générées par explosion.

### Conclusion

La prédiction de l'équation d'état des produits de détonation couplée à un modèle de décomposition de l'explosif calibré sur un nombre minimal d'expériences élémentaires permet désormais de rendre compte de situations allant de l'amorçage par choc fort aux interactions complexes d'ondes en écoulement divergent ou convergent.

### RÉFÉRENCES

- [1] N. DESBIENS, V. DUBOIS, C. MATIGNON, R. SORIN, « Improvements of the CARTE thermochemical code dedicated to the computation of properties of explosives », *J. Phys. Chem. B*, **115**, 12868 (2011).
- [2] E. BOURASSEAU, J.-B. MAILLET, N. DESBIENS, G. STOLTZ, « Microscopic calculations of Hugoniot curves of neat triaminotrinitrobenzene [TATB] and of its detonation products », *J. Phys. Chem. A*, **115**, 10729 (2011).
- [3] V. DUBOIS, N. DESBIENS, E. AUROUX, « New developments of the CARTE thermochemical code: Calculation of detonation properties of high explosives », *Chem. Phys. Lett.*, **494**, p. 306-311 (2010).
- [4] C. MATIGNON, R. SORIN, O. BOZIER, « Detonation propagation of converging front in IHE: comparison of direct numerical simulation and detonation shock dynamics against experimental data », *Proc. 10<sup>th</sup> Int. Symposium on Detonation*, April 11-16, 2010, Coeur d'Alene Resort, Idaho, p. 1182-1190 (2010).